

## MODELIZACIÓN TÉRMICA CON CAMBIO DE FASE DE LA PARED DE UN EMBALAJE PARA PRODUCTOS BIOLÓGICOS

**M. Medina<sup>1,2</sup>, A. Boucíguez<sup>3</sup>, M. Olguín<sup>1</sup>, M. A. Lara<sup>1,4</sup>.**

<sup>1</sup>-Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. (UNR). Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario. Argentina.

<sup>2</sup>-Consejo de Investigaciones. (UNR)

<sup>3</sup> INENCO - Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150 - 4400 Salta. Argentina.

<sup>4</sup>-Instituto de Física Rosario -IFIR- (CONICET- UNR). Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario. Argentina..

E-mail. [mmedina@fceia.unr.edu.ar](mailto:mmedina@fceia.unr.edu.ar) / [bouciga@unas.edu.ar](mailto:bouciga@unas.edu.ar) / [mcolguin@fceia.unr.edu.ar](mailto:mcolguin@fceia.unr.edu.ar) / [malara@fceia.unr.edu.ar](mailto:malara@fceia.unr.edu.ar)

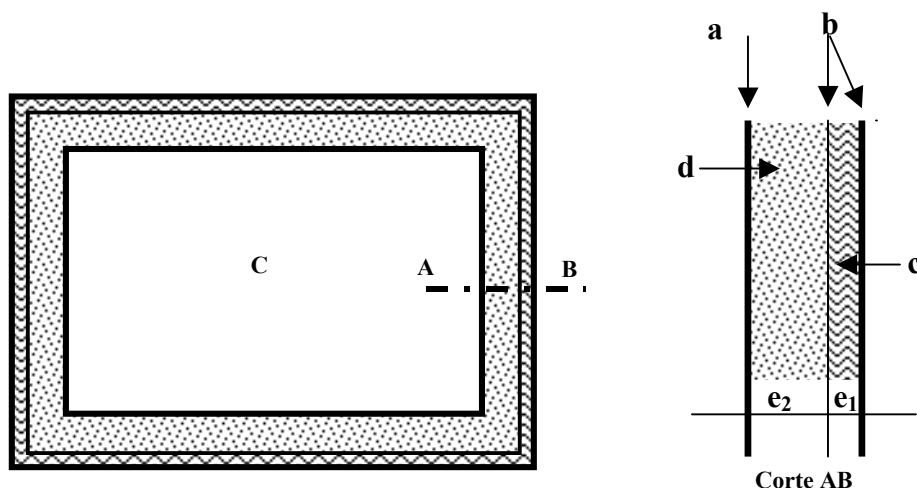
**RESUMEN:** En el presente trabajo se realiza el estudio de la evolución del frente de fusión y de la temperatura en la pared de un contenedor para productos biológicos generadores de calor a través de la respiración. Se analizan dos sustancias con parámetros térmicos distintos que presentan cambio de fase a temperatura ambiente, sometidas a flujo de calor constante. Se utilizan tres modelos de cálculo numérico a fin de realizar una comparación entre ellos. Los resultados demuestran que estos tres modelos son aptos para tales fines y arrojan resultados similares (difieren como máximo en un 5%).

**Palabra claves:** Conservación de productos biológicos, cambio de fase, modelización y simulación.

### 1 INTRODUCCIÓN

Una gran variedad de frutas y hortalizas que se producen en la zona noroeste del país deben ser trasladados a otras regiones. Para ello, es necesario contar con vehículos que aseguren el mantenimiento de condiciones de temperatura (y muchas veces humedad y atmósfera) adecuada para la conservación de estos productos. Si bien, existen transportes muy bien acondicionados, esto se logra utilizando energía convencional. También se las traslada en vehículos sin ningún tipo de acondicionamiento térmico, lo que va en desmedro de su calidad final. Con el fin de reducir el uso y los costos de la energía o de mejorar el acondicionamiento térmico en el traslado, se ha pensado en regular su temperatura a través de la utilización de sustancias con adecuada temperatura de cambio de fase.

En trabajos anteriores (Boucíguez et al. 2001), se ha estudiado la factibilidad de utilización de sustancias con adecuada temperatura de cambio de fase en la conservación de productos alimenticios, embalándolos en recipientes con una doble pared, en la que se coloque la sustancia (ver figura 1). En el caso de transporte y almacenamiento de productos biológicos, en general, es necesario mantener la temperatura interior igual a la temperatura del almacenamiento óptima. Esto garantiza la conservación y calidad de las características del organolépticas para un período máximo de tiempo que depende del producto.



*Figura 1 - Embalaje individual y corte de la pared. a: hierro, b: plástico o fibra de vidrio con resina poliéster o hierro, c: aislante de poliuretano o polipropileno para prevenir las fluctuaciones externas, d: sustancia reguladora, e<sub>1</sub>: espesor del aislante; e<sub>2</sub>: espesor variable de la sustancia reguladora con temperatura de cambio de fase óptima para el almacenamiento para cada producto. C: producto para su conservación y/o transporte.*

Como consecuencia de la respiración de una sustancia biológica almacenada, se produce un flujo de calor que de no ser evacuado aumentará la temperatura a valores no convenientes. En una primera aproximación, se supone que este flujo de calor es constante, que la sustancia reguladora se localiza en las paredes del embalaje y que la fusión de esta última absorberá

dicha energía. Las dimensiones del embalaje (ancho, largo y alto) son suficientemente grandes con respecto al espesor como para considerar una transmisión de calor unidimensional.

Desde el punto de vista matemático, se debe resolver un problema de Stefan, a una fase, con una condición de flujo impuesto en uno de los extremos. Este problema no posee solución exacta, salvo en casos muy específicos, pero se lo puede calcular a través de una aproximación numérica.

En este trabajo se muestra el estudio de la frontera líquido-sólido y de las temperaturas dentro de la pared, a través de tres métodos numéricos diferentes, a fin de realizar una comparación entre los resultados. La simulación permitirá determinar las características que debe reunir el material de cambio de fase para mantener el producto en condiciones óptimas

## PLANTEO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA

Teniendo presente que el objetivo es determinar la posición de la frontera líquido-sólido y los valores de temperatura en función del flujo de calor y del tiempo que permanecerá almacenado, se plantea el siguiente problema matemático:

Encontrar  $s = s(t)$  (frontera líquida – sólido en función del tiempo) definido para  $t > 0$  con  $s(0) = 0$ , y la temperatura  $T$

$$\begin{cases} T(x,t) & 0 < x < s(t), t > 0 \\ T_{cf} & s(t) \leq x < e_2, t > 0 \end{cases} \quad (1)$$

que satisfaga las condiciones siguientes:

$$\begin{cases} i) \rho \cdot c \cdot T_t = k T_{xx}, & 0 < x < s(t), t > 0 \\ ii) k T_x(0,t) = -K, & t > 0 \\ iii) T(s(t),t) = T_{cf}, & t > 0 \\ iv) k T_x(s(t),t) = -\rho \cdot l \cdot \dot{s}(t), & t > 0 \\ v) s(0) = 0, \end{cases} \quad (2)$$

donde  $x$  es la variable espacial y  $t$  es la variable temporal,  $e_2$  es el espesor del embalaje. Las constantes físicas  $k$  (conductibilidad térmica),  $\rho$  (densidad),  $l$  (calor latente), y  $c$  (calor específico) pertenecen a la sustancia con temperatura de cambio de la fase  $T_{cf}$ .  $K$  es el flujo de calor constante en la frontera interior ( $x=0$ ). Este flujo se calcula en función de la masa (que es función de las dimensiones del embalaje) y de la temperatura del producto biológico (Kader, 1992).

Aunque para este tipo de datos no hay solución analítica (o exacta), existen resultados teóricos que garantizan la existencia y la singularidad de la solución (Tarzia, 1984).

## MODELO 1: DE DIFUSIÓN

Con el fin de resolver numéricamente el problema se discretizan las ecuaciones (2i) y (2iv) ( las que están sujetas a las condiciones iniciales y de borde dadas por las ecuaciones (2ii), (2iii) y (2v) (Alexiades y Solomon, 1993). De tal proceso se tiene.

$$\alpha \frac{(T(i-1,j) - 2T(i,j) + T(i+1,j)))}{(\Delta x)^2} = \frac{(T(i,j) - T(i,j-1))}{\Delta t} \quad (3)$$

$$\rho L \frac{s(j) - s(j-1)}{\Delta t} = \pm k \frac{\delta T}{\delta x} \quad (4)$$

Donde  $\Delta x$  y  $\Delta t$ , representan, respectivamente, el intervalo espacial y temporal considerado para el cálculo;  $\delta T$  el pequeño salto térmico entre la temperatura más próxima a la frontera y la de fusión en el espacio  $\delta x$ . El índice  $i$  corresponde a la variación de la variable espacial  $x$  y el  $j$  a la temporal  $t$ . Se emplea un modelo de cálculo en diferencias finitas implícitas utilizando para su resolución el método de Crank - Nicolson, que permite evaluar tanto las temperaturas  $T(x,t)$  como la posición de la frontera  $s(t)$ , ambas en función del tiempo.

## MODELO 2 : DE MALLA VARIABLE EN EL TIEMPO

En este caso se considera el problema definido en (2) pero considerando la expresión (2iv) en su forma integral:

$$s(t) = \frac{K}{\rho \cdot \ell} t - \frac{c}{\ell} \int_0^{s(t)} T(x, t) - T_{cf} dx \quad (5)$$

Este problema análogo es resuelto numéricamente aplicando el método de diferencias finitas implícitas con paso de tiempo variable. Es decir que en cada punto de la malla se obtiene, como parte de la solución, el tamaño del paso de tiempo para que la frontera libre esté exactamente en un vértice de la malla. Esto lleva a un sistema de ecuaciones lineales que se resolverá en cada paso de tiempo mediante un proceso iterativo (Gauss-Seidel).

### Discretización del problema

Se puede escribir el problema anterior en forma discreta de la manera siguiente (Zerroukat y Chatwin, 1995):

$$-z_{j+1} T_{i-1,j+1} + (1 + 2z_{j+1}) T_{i,j+1} - z_{j+1} T_{i+1,j+1} = T_{i,j} \quad \forall i = 2, \dots, j+1, \quad (6i)$$

$$T_{1,j+1} = T_{2,j+1} + \frac{K \Delta x}{k}, \quad (6ii)$$

$$T_{j+2,j+1} = T_{cf}, \quad (6iii)$$

$$\Delta t_j^{(r)} = \Delta x \frac{c\rho}{K} \left[ \sum_{i=2}^{j+1} T_{i,j+1}^{(r)} - (j+1)(T_{cf} - \frac{\ell}{c}) \right] - t_j, \quad \forall r = 1, \dots, q, \quad (6iv)$$

$$s_0 = 0. \quad (6v)$$

Donde  $\Delta x = \frac{E}{N}$ ,  $x_i = (i-1)\Delta x \quad i = 1..j+1$ ,  $t_j = \sum_{r=0}^{j-1} \Delta t_r \quad j \geq 1$ .

$$z_j = \frac{\alpha \Delta t_{j-1}^{(r)}}{\Delta x^2}, \quad \text{con} \quad \alpha = \frac{k}{\rho c}, \quad T_{i,j} = T(x_i, t_j), \quad s_j = s(t_j) = j \Delta x,$$

El algoritmo de cálculo se realiza tomando una estimación conveniente de  $\Delta t_j$ , computando la temperatura en todo punto de la malla de (6i,ii) y el valor estimado de  $\Delta t_j$  se reevalúa seguidamente de (6iv). Este proceso iterativo se repite hasta que se logra la exactitud deseada.

## MODELO 3: DE ENTALPÍA.

En este modelo se utiliza una formulación en entalpía, surgida de un balance de energía. Este método es completamente general, se puede tratar cualquier problema de transferencia de calor, con o sin cambio de fase, un problema de Stefan de una o dos fases, calculando las temperaturas y el frente de fusión. La ecuación unidimensional del calor puede escribirse como

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial^2 K}{\partial x^2} \quad (7)$$

donde  $H$  es la entalpía y  $\hat{K}$  es la transformada de Kirchoff (Laitinen y Neittaanmaki, 1988), definidas como:

$$H(T) = \int_0^T \rho(\xi) c(\xi) + \rho(\xi) l \frac{\partial f_s}{\partial T} d\xi \quad (8)$$

$$\hat{K}(T) = \int_0^T k(\xi) d\xi \quad (9)$$

donde la densidad  $\rho$ , la conductividad  $k$  y el calor específico  $c$  son funciones de la temperatura (en este modelo se los ha tomado constantes).  $f_s$  la fracción sólida que varía con la temperatura durante el cambio de fase,  $l$  calor latente. La dependencia de la entalpía  $H$  versus la temperatura  $T$  tiene en cuenta un salto correspondiente al cambio de fase que considera también el fenómeno de la fracción sólida variable. Las condiciones de contorno son (2ii, 2iii y 2v).

#### Aproximación Numérica

La ecuación (7) puede ser discretizada en la forma clásica del método de las diferencias finitas explícitas.

$$\frac{\partial H}{\partial t} \rightarrow \frac{H_i^{j+1} - H_i^j}{\Delta t} \quad (10)$$

donde  $H_i^j$  representa el valor de la entalpía discretizada en el punto  $i$  y en paso de tiempo  $j$ .

$$\frac{\partial^2 \hat{K}}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\hat{K}_{i+1}^j - 2\hat{K}_i^j + \hat{K}_{i-1}^j}{\Delta x^2} \quad (11)$$

análogamente  $K_i^j$  representa el valor de la transformada de Kirchoff discretizada en el punto  $i$  y en paso de tiempo  $j$ . De esta forma la ecuación (13) discretizada permite calcular los valores de entalpía en el paso de tiempo siguiente.

$$H_i^{j+1} = F\left[H^j(\cdot), \hat{K}^j(\cdot)\right] \quad (12)$$

donde se debe verificar la condición de estabilidad:

$$\frac{k}{\rho c} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \quad (13)$$

La posición del frente de cambio de fase es recuperada ‘a posteriori’ a partir del análisis de los valores de las temperaturas, lo que lo caracteriza como un esquema de captura de frente. En el primer intervalo espacial (el menor  $i$ ) donde  $T_i^{j+1} < T_f$  en un problema de derretimiento, se calcula la posición del frente por interpolación lineal. Este método es simple, pudiéndose mejorar mediante el concepto de fracción sólida (Alexiades y Solomon, 1993) o por el método de Tacke (1985).

## RESULTADOS OBTENIDOS

Se analizan los resultados de dos sustancias orgánicas diferentes, estearato de butilo y difenil metano (ver Tabla 1), con el propósito de evaluar su comportamiento a lo largo de un periodo de 36 horas.

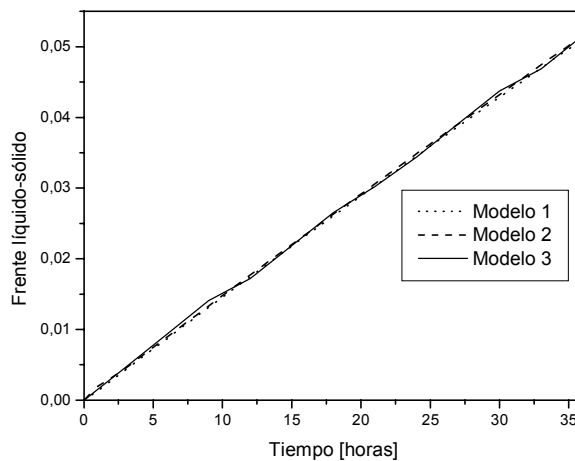


Fig. 2: Posición del frente de fusión según las horas transcurridas en los tres modelos evaluados, para el caso del estearato de butilo.

Se supone que el flujo de calor generado por la respiración de la sustancia orgánica en el embalaje es constante e igual a 40 W/m<sup>2</sup> (Kader, 1992). El periodo de 36 horas un tiempo aceptable de transporte. En la figura 2 se representan los resultados

de los tres modelos de cálculo, con una malla de 64 elementos. Se puede observar la coincidencia entre los tres métodos. En la figura 3 se representa un perfil típico de variación de temperaturas dentro de la pared.

Sustancia	Tf (°C)	k (W/ m°C)	$\rho$ (Kg/m <sup>3</sup> )	c (J/Kg °C)	L (J/Kg)
estearato de butilo	12	0.240	800	1600	120000
difenilmetano	25	0.142	1000	1622	105500

Tabla 1. Parámetros térmicos correspondientes a las sustancias reguladoras utilizadas.

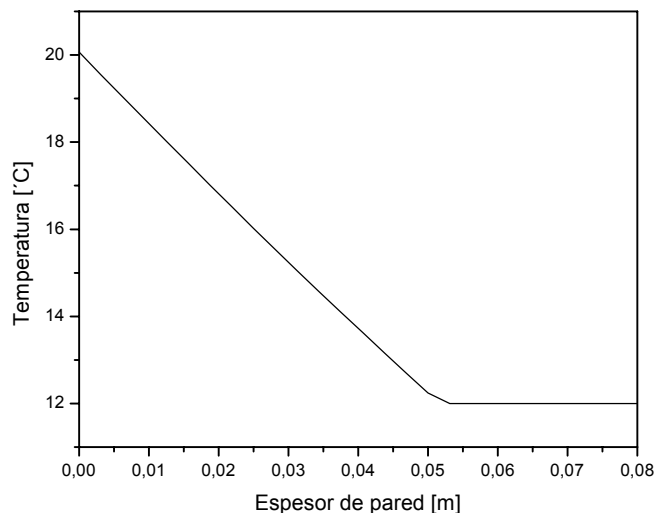


Figura 3: Distribución de temperatura en la pared a las 36 horas, calculada según el modelo 3.

El cálculo de los valores de posición de frente de solidificación y de las temperaturas es mejorado mediante una técnica de extrapolación cuadrática, que consiste en calcular simultáneamente con tres mallas. En nuestro caso con 16, 32 y 64 divisiones espaciales. Por ejemplo, un valor de temperatura extrapolado  $T$  se obtendrá como la ordenada al origen de la parábola que pasa por  $(1/16, T_{16})$ ,  $(1/32, T_{32})$ ,  $(1/64, T_{64})$ , donde  $T_n$  es la temperatura calculada con  $n$  divisiones espaciales. El valor extrapolado corresponde a cuando  $(1/n \rightarrow 0)$ .

Nº divisiones espaciales	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
16 divisiones	0,0502	0,0518	0,05
32 divisiones	0,0508	0,0516	0,0505
64 divisiones	0,0511	0,0515	0,0516
Valor			
Extrapolado	0,0514	0,0514	0,0516

Tabla 2: Valores de la frontera líquido sólido a las 36 horas para el caso del estearato de butilo

Nº divisiones espaciales	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
16 divisiones	22,25	21,937	20,18
32 divisiones	21,15	20,927	20,13
64 divisiones	20,61	20,216	20,07
Valor			
Extrapolado	20,07	19,37	19,97

Tabla 3: Valores de la temperatura en el borde a las 36 horas para el caso del estearato de butilo

Nº divisiones espaciales	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
16 divisiones	0,04394	0,04604	0,04375
32 divisiones	0,04412	0,04561	0,04452
64 divisiones	0,04478	0,04543	0,04531
Valor			
Extrapolado	0,0458	0,04527	0,04637

Tabla 4: Valores de la frontera líquido sólido a las 36 horas para el caso del difenilmetano

Nº divisiones espaciales	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
16 divisiones	39,032	38,203	36,85
32 divisiones	38,324	38,083	36,785
64 divisiones	37,539	37,096	36,879
Valor			
Extrapolado	36,469	35,491	37,0573

Tabla 5: Valores de la temperatura en el borde un las 36 horas para el caso del difenimetano.

En las tablas 2 a 5 se observan los resultados para los diferentes métodos aplicados. Frente a la poca dispersión de resultados, el modelo 1 es el más fácil de implementar, mientras que el modelo 3 presenta mejores resultados con mallas más gruesas. La dispersión de valores entre los resultados extrapolados no difieren en más del 5%.

El difenilmetano presenta cambio de fase a temperatura relativamente alta, lo que no lo hace apto para su utilización en la mayoría de los casos de conservación y transporte de sustancias biológicas, si bien fue utilizado por el conocimiento de los parámetros termofísicos.

## CONCLUSIONES

Se ha presentado el cálculo del desplazamiento del frente de fusión y de la evolución de las temperatura en dos sustancias con la condición de flujo de calor constante. Estas sustancias fueron elegidas considerando su disponibilidad en plaza y sus parámetros térmicos, lo que las hace aptas para su uso en aplicaciones concretas. Se observa que los tres métodos arrojan resultados similares, siendo el primero (difusión 1) el más sencillo, el segundo (grilla móvil) permite seguir la grilla paso a paso, mientras que el tercero (entálpico), requiere mayor tiempo de cálculo. Cualquiera de los tres métodos permite evaluar en una primera aproximación el espesor de pared de los embalajes, como también seleccionar la sustancia más apropiada.

Se ha realizado una mejora en el cálculo en los tres modelos, a través de una extrapolación cuadrática. Los resultados en el estearato de butilo son muy similares, en cambio en el difenil metano se observan diferencias mayores. La causa puede encontrarse en los valores de las constantes térmicas (ver Tabla 1), como conductividad y calor latente. En el futuro, se analizará la sensibilidad del modelo a los parámetros físicos. Es importante saber cuál de estos parámetros tienen más influencia en el cálculo para mejorar la caracterización en el laboratorio.

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se realizó en el marco del proyecto de Investigación 943 del CIUNSa.(Consejo de Investigaciones de la Universidad Nacional de Salta) y del Proyecto “Modelización en Solidificación” de la Universidad Nacional de Rosario.

## ABSTRACT

In this work a study of the temporal interface liquid-solid position and of the temperature in a wall of a biological products container is presented. There is a heat generation through the respiration of biological products that is absorbed by the phase change of a substance. Two different phase change materials are analyzed when the boundary condition is a constant heat flux. These substances have different thermal parameters and the melting point is at ambient temperature. Three different computational models are presented with the purpose of comparison. The results show that the three models are adequate to analyze the problem, they differ as maximum in 5 %.

**Keywords:** Biological product conservation, phase change, numerical simulation

## REFERENCIAS

- Boucíguez, A, Villa, L, Lara, M. A.. Análisis de sustancias de cambio de fase para su utilización en el envasado y transporte de productos alimenticios. VI Congreso Iberoamericano de Aire acondicionado y Refrigeración, CIAR 2001.
- Kader, A.A, 1992. Postharvest Technology of Horticultural Crops. Univ. California. Publication 3311.
- Alexiades, Vand Solomon, A., 1993, Mathematical Modeling of Melting and Freezing Proceses. Hemisphere. Publishing Corporation.
- Zerroukat M., Chatwin C. R, 1994, Computational moving boundary problems, John Wiley & Sons, New York.
- Laitinen, E and Neittaanmaki, P , 1988, On numerical solution of the problem connected with the control of the secondary cooling in the continuous casting process. Control-Theory and Advanced Technology, Vol 4, N° 3, pp. 285-305.
- Tacke, K, 1985, “Discretization of the explicit enthalpy method for planar phase change”. International Journal for Numerical Methods in Engineering”, Vol. 21, pp.543-554
- Tarzia, D., 1984, “Seminario sobre Problemas de Stefan y sus Aplicaciones”. Cuadernos del Instituto de Matemática “Beppo Levi”, Rosario, Argentina. pp 5 - 32.